

# 结构化学自测题一

## 一、选择题（60分）

1、氢原子的 Hamiltonian 算符  $\hat{H}$  是（ ）

(A)  $\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{r}$

(B)  $-\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}$

(C)  $\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}$

(D)  $-\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{r}$

2、下列波函数中量子数  $n$ 、 $l$ 、 $m$  具有确定值的是（ ）

(A)  $\varphi(3d_{xz})$  (B)  $\varphi(3d_{yz})$  (C)  $\varphi(3d_{xy})$  (D)  $\varphi(3d_{z^2})$  (E)  $\varphi(3d_{z^2-r^2})$

3、如果一个原子的主量子数是 4，则它（ ）

(A) 只有 s、p 电子 (B) 只有 s、p、d 电子

(C) 有 s、p、d 和 f 电子 (D) 有 s、p 电子

4、如果  $E_0$  是一维势箱中电子最低能态的能量，则电子的较高一级能态的能量  $E_1$  是（ ）

(A)  $2E_0$  (B)  $4E_0$  (C)  $8E_0$  (D)  $16E_0$

5、氢原子 4d 径向函数对  $r$  做图的节点数为（ ）

(A) 0 (B) 1 (C) 2 (D) 3

6、光是由量子组成的，如光电效应所展示的那样。已发现光电流依赖于（ ）

(A) 入射光的频率 (B) 入射光的位相和频率

(C) 入射光的强度和频率 (D) 仅仅入射光的强度

7、某元素以面心立方结构结晶出来，试问每一单元晶胞中该元素的原子数为（ ）

(A) 1 (B) 2 (C) 4 (D) 6

8、 $\text{ClO}_3\text{F}$  的几何构型属于（ ）

(A) 正方形平面 (B) 三角形平面 (C) 正四面体 (D)

四面体

- 9、波长为 10pm 的光子能量为 ( )  
 (A) 12.4eV      (B) 124eV      (C) 0.12eV      (D)  $1.24 \times 10^5$ eV
- 10、欲用 150V 电压加速电子，则与之相应的德布罗意波长约为 ( )  
 (A) 10nm      (B) 1nm      (C) 0.1nm      (D)  $1 \times 10^{-2}$ nm
- 11、与 3 个晶轴的截长分别为  $(1/2)a$ 、 $(1/3)b$ 、 $(1/6)c$  的晶面符号是 ( )  
 (A)  $(1/2 \ 1/3 \ 1/6)$       (B)  $(2 \ 3 \ 6)$       (C)  $(3 \ 2 \ 1)$       (D)  $(2 \ 3 \ 1)$
- 12 分子轨道是 ( )  
 (A) 分子中电子运动的状态函数      (B) 分子中电子空间运动的轨道  
 (C) 分子中单电子空间运动的状态函数      (D) 原子轨道的线性组合
- 13、 $ns^2$  组态的光谱项是 ( )  
 (A)  $^2S_{1/2}$       (B)  $^2S$       (C)  $^1S$       (D)  $^1S_0$
- 14、化合物  $CO_2$ 、 $CO$  和  $(CH_3)_2CO$  中，碳氧键键长是 ( )  
 (A)  $CO$  最长， $CO_2$  最短      (B)  $CO_2$  最长， $(CH_3)_2CO$  最短  
 (C) 一样长      (D)  $CO$  最短， $(CH_3)_2CO$  最长
- 15、反式乙烷所属点群为 ( )  
 (A)  $C_3$       (B)  $D_{3d}$       (C)  $C_{3v}$       (D)  $C_{2v}$
- 16、测不准关系的含义是指 ( )  
 (A) 粒子太小，不能准确测定其坐标      (B) 运动不快时，不能准确测定其动量  
 (C) 粒子的坐标的动量都不能准确地测定      (D) 不能同时准确地测定粒子的坐标与动量
- 17、下列分子中，键角最大的是 ( )  
 (A)  $H_2O$       (B)  $NF_3$       (C)  $NH_3$       (D)  $OF_2$
- 18、配合物  $[Co(CN)_6]^{4-}$  中，未成对电子数为 ( )  
 (A) 0      (B) 1      (C) 2      (D) 3
- 19、下列化合物中，Cl 的活泼性最强的是 ( )  
 (A)  $C_6H_5Cl$       (B)  $C_6H_5CH_2Cl$       (C)  $(C_6H_5)_2CHCl$       (D)  $(C_6H_5)_3CCl$
- 20、下列晶体中，离子极化最强的是 ( )

- (A) AgF      (B) AgCl      (C) AgBr      (D) AgI
- 21、振动-转动分子能级跃迁产生光谱的区域为 ( )  
 (A) 远红外      (B) 近红外      (C) 远紫外      (D) 近紫外
- 22、下列分子中, 无振动光谱的有 ( )  
 (A) NH<sub>3</sub>      (B) CH<sub>4</sub>      (C) H<sub>2</sub>O      (D) N<sub>2</sub>
- 23、下列分子中, 具有偶极矩的是 ( )  
 (A) CH<sub>4</sub> (B) CO<sub>2</sub> (C) SF<sub>6</sub> (D) NH<sub>3</sub>
- 24、下列稳定性次序, 正确的是 ( )  
 (A)  $H_2^+ > H_2 > H_2^-$  (B)  $O_2^+ > O_2^- > O_2$  (C)  $N_2^+ > N_2 > N_2^-$  (D)  $F_2^+ > F_2 > F_2^-$
- 25、假定 CH<sub>3</sub> 基是平面的, 则不成对电子应处于 ( )  
 (A) 2s      (B) 2p<sub>x</sub>      (C) 2p<sub>y</sub>      (D) 2p<sub>z</sub>
- 26、下列的跃迁中, 违反跃迁选择定律的是 ( )  
 (A)  ${}^2D_{3/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$       (B)  ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$       (C)  ${}^2F_{5/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$       (D)  ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$
- 27、第 26 号元素+3 价离子的正八面体低自旋配合物中, 未成对电子数为 ( )  
 (A) 0      (B) 1      (C) 2      (D) 3
- 28、下述+2 价离子中, 水合热最大的是 ( )  
 (A) Mn<sup>2+</sup>      (B) Cr<sup>2+</sup>      (C) Ni<sup>2+</sup>      (D) Zn<sup>2+</sup>
- 29、证实电子具有自旋的实验是 ( )  
 (A) 戴维逊-革末实验 (B) 斯特恩-盖拉赫实验      (C) 氢原子光谱      (D) 光电效应
- 30、某金属离子在八面体弱场中的磁矩为 4.90 玻尔磁子, 而在强场中的磁矩为零, 该中心离子应为 ( )  
 (A) Cr<sup>3+</sup>      (B) Mn<sup>2+</sup>      (C) Fe<sup>2+</sup>      (D) Co<sup>2+</sup>
- 二、判别正误 (“√”表示正确, “×”表示错误)(10分)
- 1、在 B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> 和 Al<sub>2</sub>(CH<sub>3</sub>)<sub>6</sub> 中, 都存在双电子三中心键。( )
- 2、H<sub>2</sub> 分子之所以能稳定存在, 是由于电子配对的结果。( )
- 3、立方晶系的特征对称元素是 4 个按立方体的对角线取向的三重旋转轴。( )

- 4、任何分子中，LUMO 的能量一定高于 HOMO 的能量。( )
- 5、已知  $\text{Cl}_2$  离解为 Cl 原子需 2.48eV 能量，而 500nm 的光具有 2.48eV 的能量，故需使用波长大于 500nm 的光才能使  $\text{Cl}_2$  光离解。( )
- 6、稳定态的几率密度分布与时间无关。( )
- 7、对任何原子（不是离子），必有  $E_{3s} < E_{3p} < E_{4s} < E_{3d}$ 。( )
- 8、实波函数  $\psi_{2p_x}$ 、 $\psi_{2p_y}$  分别对应于复波函数  $\psi_{21+1}$ 、 $\psi_{21-1}$ 。( )
- 9、凡  $sp^3$  杂化轨道成键的分子，其空间构型都为正四面体。( )
- 10、多电子原子的原子轨道角度分布图和类氢离子的图形完全一样。

三、填空题（10 分）

1、已知双原子分子的振动可看作一维谐振子，其位能  $V = (1/2)Kx^2$ （K 为弹力常数），则体系的定态薛定谔方程为\_\_\_\_\_。

2、直链共轭烯烃中的  $\pi$  电子可看成是运动于一维势箱中的粒子，并按各能级最多只能容纳 2 个电子的规则，由低到高填充各个能级。对于丁二烯，若取 C—C 键平均键长  $a = 140\text{pm}$ ，则  $\pi$  电子在最高占有轨道和最低空轨道间跃迁辐射的波长为\_\_\_\_\_pm。

3、用量子力学求解三维立方箱中粒子的问题得到：

$$\psi_{x,y,z} = \left(\frac{8}{a^3}\right)^{1/2} \sin \frac{n_x \pi}{a} x \sin \frac{n_y \pi}{a} y \sin \frac{n_z \pi}{a} z$$

$$E = \frac{h^2}{8ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

当  $E < \frac{15h^2}{8ma^2}$  时，在此范围内有\_\_\_\_\_个状态、\_\_\_\_\_个能级。

4、已知氢原子中电子的一个状态为：

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} (a_0)^{-3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$$

则量子数 n 为\_\_\_\_\_，l 为\_\_\_\_\_，m 为\_\_\_\_\_，轨道名称为\_\_\_\_\_。

5、氢原子  $E_{4s}$ \_\_\_\_\_  $E_{3d}$ ，氮原子的  $E_{4s}$ \_\_\_\_\_  $E_{3d}$ ，钠原子的  $E_{4s}$ \_\_\_\_\_  $E_{3d}$  铁原子的

$E_{4s}$  \_\_\_\_\_  $E_{3d}$  (填“<”或“>”)

四、计算题 (20分)

1、设有  $N_2$  和  $HBr$  混合气体，其远红外光谱中头几条线的理论波数近似为  $16.7\text{cm}^{-1}$ 、 $33.40\text{cm}^{-1}$ 、 $50.10\text{cm}^{-1}$ 。

- (1) 这些光谱是由分子的什么运动产生的？
- (2) 这些谱线是由哪个分子产生的？
- (3) 计算这个分子的核间距。

2、已知  $NaCl$  晶体是由立方面子晶胞组成，其晶胞参数  $a=563.9\text{pm}$ 。

- (1) 写出原子分子坐标；
- (2) 写出  $Na^+$  和  $Cl^-$  的配位数；
- (3) 计算晶面 (110) 及 (100) 的晶面间距；

## 自测题一参考答案

一、

1. B; 2. D; 3. B; 4. B; . 5. B; . 6. C; 7. C; 8. D; 9. D; 10. C; 11. B;  
12. C; 13. C; 14. D; 15. B; 16. D; 17. C; 18. B; 19. D; 20. D; 21. B;  
22. D; 23. D; 24. D; 25. D; 26. A; 27. B; 28. C; 29. B; 30. C。

二、

1. √ 2. × 3. √ 4. × 5. × 6. √ 7. × 8. × 9. × 10. √

三、

$$1. \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - \frac{1}{2}kx^2)\psi = 0$$

2.  $2.06 \times 10^5 \text{ pm}$                       3. 17; 6                      4. 2; 1;

5. >; >; <; >

四、

1. (1) 由波数可知是转动光谱，即是由分子转动运动的能级跃迁产生的。

因为只有极性分子才能有转动光谱，所以是 HBr 的。

$$(2) 2B = 16.70, \quad \Delta\bar{\nu} = 2B = \frac{2h}{8\pi^2 I_c}$$

$$I = \frac{2h}{8\pi^2 c \Delta\bar{\nu}} = 3.352 \times 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$$

$$\mu = 1.653 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$(3) r = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = 142.4 \text{ pm}$$

2、

$$(1) \text{Na}^+ : \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right), \left(0, \frac{1}{2}, 0\right), \left(0, 0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right);$$

$$\text{Cl}^- : (0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right);$$

(2) 配位数为 6: 6;

(3)  $d_{100} = 563.0 \text{ pm}, d_{110} = 398.7 \text{ pm};$

(4)  $\rho = \frac{NM}{VN_A} = 2.16 \text{ g.cm}^{-3}。$